スピン格子緩和

早稲田大理　清水敏寛

（8月20日受理）

§1. Introduction

Brown 運動，磁気緩和現象等2つの系が，相互作用をしている場合には，次の様な問題が生ずる。即ち，相互作用をしている2つの系を系1，系2とすると，初期の時刻では系1だけの operator であった物理量が時間の経過と共に相互作用エネルギーによって系1，系2の両方の operator になってしまう。ところが，実際に観測される系はその中の一方だけであることが多い ― Brown 運動では Brown 粒子，spin－lattice 緩和現象では spin 系だけをそれぞれ観測している。 ― ので，注目している系，例えば系1の operator の時間的発展を調べる時には，その operator が時間が経た後で系1，系2の両方の operator になった時でさえ，系1の operator としての知識だけで十分なことが多い。従って2つの系を合わせた全系の operator を観測している系の operator に reduce することが必要になる。

具体的な例としては，Wangsness－Bloch の式[1)]があげられる。Wangonss と Bloch は現象論的な Bloch の式を microscopic な立場から説明するために，古典的な Boltzmann の式に対応する Wangsness－Bloch の式を導いた。そこでは全系（spin－system と molecular surroundings とが相互作用用をしている系）の density matrix を ρ とすると ρ の molecular surroundings の operator に関しては Trace をとったもの，即ち $\sigma \equiv T_{r_{\mathrm{II}}} \rho$ についての式を導くことが問題であった。この式を導く際に，いくつかの仮定をしたが，その中で特に重要なものは次の2点である。

1） time scale について：時間間隔は次の条件

$$|E_0|t \gg 1 \qquad \omega^* t \gg 1 \qquad (kT/\hbar)t \gg 1$$

を満足するほど長くなければならないし，また次の条件

$$|E_1|t \ll 1 \qquad |\Gamma|t \ll 1$$

を満すほど短かくなければならない。ここで $|E_0|$ は一定の外部磁場による Zeeman energy の order，$|E_1|$ は時間に依存した磁場による Zeeman energy，ω^* は molecular surroundings の characteristic frequency，そして $|\Gamma|$ は transition probability に関係した量である。

2） Spin 系と相互作用している molecular surroundings は常に熱平衡の状態にあって，heat bath の役目をする。

この論文では次の様な仮定の下に σ に関する式を出して，Bloch の結果と比較する。

1） time scale について：相互作用エネルギーの大きさを λ とすれば，次式が成り立つような時間間隔をとる。

$$\lambda^2 t \sim O(1)$$

2） molecular surroundings は初期の時刻 $t=0$ でだけ，熱平衡を仮定する。

まず§2では σ に関する formal な式を λ^2 の order まで求め，§4では実際の系にこの方法を適用する。そして spin－lattice 緩和時間が Kubo－Tomita の結果[2]と一致することを示す。

§2. Formal Theory

今考えている total system の Hamiltonian は次の形で表わせる。

$$H = E + F + \lambda G \tag{2.1}$$

ここで E は system Ⅰ の Hamiltonian，F は system Ⅱ の Hamiltonian，そしてGは両者の相互作用のエネルギーをそれぞれ表わす。λ はGの

大きさを示すパラメータである。以下では E，F を同時に diagonal にする表示を使う。

Hamiltonian が（2.1）で表わせる時，density matrix は $\hbar=1$ とする単位系で次の式に従う。

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = -i[H, \rho(t)] \tag{2.2}$$

まず Liouville operator $L = L_0 + \lambda L_1$ を次の式で定義する。

$$\begin{aligned} iL\rho &= i[H,\rho] = i[E+F, \rho] + i\lambda[G,\rho] \\ &= iL_0\rho + \lambda L_1\rho \end{aligned} \tag{2.4}$$

次に Projection operator P を次の様に定義する。

$$\begin{aligned} P\rho &\equiv \frac{T_{r_{\mathrm{II}}}[\rho]}{T_{r_{\mathrm{II}}}[1]} \equiv \sigma \\ \rho &= P\rho + (1-P)\rho \equiv \sigma + \rho' \end{aligned} \tag{2.5}$$

ここで $T_{r_{\mathrm{II}}}$ は II－system の operator について Trace をとることを意味する。

operator P の定義から明らかなように，

$$P\rho' = 0 \tag{2.6}$$

operator P を（2.2）式に作用させると

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\sigma(t) &= -ip[H,\rho(t)] = ip[E,\sigma(t)] - ip[F,\sigma(t)] \\ &\quad - ip[\lambda G,\sigma(t)] - ip[E,\rho'(t)] \\ &\quad - ip[F,\rho'(t)] - ip[\lambda G,\rho'(t)] \end{aligned} \tag{2.7}$$

ところで F は system II の operator であり，$\sigma(t)$ は定義より system I の operator である。よって

$$[F, \sigma(t)] = 0 \tag{2.8}$$

また，一般性を失なうことなくして，system Ⅱ の operator としての G は次式を満すものと仮定する。

$$PG = \frac{T_{r_{\mathrm{II}}}[G]}{T_{r_{\mathrm{II}}}(1)} = 0 \tag{2.9}$$

その時

$$P[G, \sigma(t)] = (PG)\sigma(t) - \sigma(t)(PG) = 0 \tag{2.10}$$

（2.6）式を使うと

$$P[E, \rho'(t)] = E(P\rho'(t)) - (P\rho'(t))E = 0 \tag{2.11}$$

また，F の固有値を f とすれば，

$$\begin{aligned} P[F, \rho'(t)] &= \sum_{ff'} \langle f|F|f'\rangle\langle f'|\rho'(t)|f\rangle \\ &\qquad - \sum_{ff'} \langle f|\rho'(t)|f'\rangle\langle f'|F|f\rangle \\ &= \sum_{f} f\langle f|\rho'(t)|f\rangle - \sum_{f}\langle f|\rho'(t)|f\rangle f = 0. \end{aligned} \tag{2.12}$$

（2.8）－（2.12）を使うと（2.7）式は次の様に書ける。

$$\frac{d}{dt}\sigma(t) = -i[E, \sigma(t)] - i\lambda P[G, \rho'(t)] \tag{2.13}$$

次に operator （1－P）を（2.2）式に作用させると，

$$\frac{d}{dt}\rho'(t) = -i(1-p)L\rho(t) = -i(1-p)L\sigma(t) - i(1-p)L\rho'(t)$$

or

$$\rho'(t) = e^{-i(1-p)Lt}\rho'(0) - i\int_0^t ds\, e^{-i(1-p)LS}(1-p)L\sigma(t-s) \tag{2.14}$$

ここで $\rho'(0)$ は $\rho'(t)$ の $t=0$ の値である。

（2.14）式を（2.13）に代入すると，$\sigma(t)$ に関する次の様な閉じた方程式

が得られる。

$$\frac{d}{dt}\sigma(t) = -i[E, \sigma(t)] - i\lambda P[G, e^{-i(1-p)Lt}\rho'(0)]$$
$$- \lambda P[G, \int_0^t ds\, e^{-i(1-p)Ls}(1-p)L\sigma(t-s)] \quad (2.15)$$

(2.8) − (2.10) を使うと

$$\begin{aligned}(1-p)L\sigma(t-s) &= L\sigma(t-s) - PL\sigma(t-s)\\ &= [E+\lambda G, \sigma(t-s)] - [E, \sigma(t-s)]\\ &= \lambda[G, \sigma(t-s)] = \lambda L_1\sigma(t-s)\end{aligned} \quad (2.16)$$

よって (2.15) 式の右辺第3項は次の形になる。

$$- \lambda P[G, \int_0^t ds\, e^{-i(1-p)LS}[G, \sigma(t-s)]] \quad (2.17)$$
$$= -\lambda^2 P[G, \int_0^t ds\, e^{-i(1-P)LS}[G, \sigma(t-s)]]$$

よく知られた次の展開式

$$e^{-i(1-p)LS} = e^{-i(1-p)L_0 S} - \lambda\int_0^t ds\, e^{-i(1-p)L_0 S}$$
$$\times i(1-p)L_1 e^{-i(1-p)L_0(t-s)} + 0(\lambda^2) \quad (2.18)$$

を使って (2.17) 式を λ^2 の order まで explicit に書くと,

$$- \lambda^2 P[G, \int_0^t ds\, e^{-i(1-p)L_0 S}[G, \sigma(t-s)]] + 0(\lambda^3) \quad (2.19)$$

次の式が正しいのを見ることは容易である。

$$e^{-i(1-p)L_0 S}[G, \sigma(t-s)] = e^{-iL_0 S}[G, \sigma(t-s)] \quad (2.20)$$

なんとなれば

$$e^{-i(1-p)L_0 S} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-is)^n}{n!}(L_0 - PL_0)^n$$

であるから，この式を〔G, σ(t−s)〕に作用させると，n＝1のとき

$$pL_0[G,\sigma(t-s)] = P[E,[G,\sigma(t-s)]] + P[F,[G,\sigma(t-s)]]$$

(2.9)より第1項は0で，第2項もまた次の様に0になる。

$$p[F,[G,\sigma(t-s)]] = \sum_f f\langle f|[G,\sigma(t-s)]|f\rangle - \sum_f \langle f|[G,\sigma(t-s)]|f\rangle f = 0$$

故に

$$p\,L_0[G,\sigma(t-s)] = 0$$

n＝2の場合を考えてみると，

$$(L_0 - pL_0)^2[G,\sigma(t-s)] = (L_0 - pL_0)L_0[G,\sigma(t-s)]$$

$pL_0L_0[G,\sigma(t-s)]$は上と同様に zero になることがわかる。故に一般に

$$(L_0 - pL_0)^n[G,\sigma(t-s)] = L_0^n[G,\sigma(t-s)]$$

よって(2.20)式が証明された。その時(2.19)式は次の様になる。

$$-\lambda^2 p\left[G, \int_0^t ds\, e^{-iL_0S}[G,\sigma(t-s)]\right] + 0(\lambda^3) \qquad (2.21)$$

さて次に(2.15)式の第2項

$$e^{-i(1-p)Lt}\rho'(0)$$

を考える。ここで t＝0 で ρ(0) は system Ⅰ と system Ⅱ の operator に factorize され，しかも system Ⅱ の operator は diagonal であるとする。即ち

$$\rho(0) = \rho_{\mathrm{I}}(0)\cdot\rho_{\mathrm{II}}(0) \qquad (2.23)$$

すると，ρ′(0) は定義から次の式で与えられる。

$$\rho'(0) = \rho(0) - \sigma(0) = \rho_{\mathrm{I}}(0)\,[\rho_{\mathrm{II}}(0) - p\,\rho_{\mathrm{II}}(0)] \qquad (2.24)$$

$\rho_{\mathrm{II}}(0)$ は diagonal であると仮定すると $\rho_{\mathrm{II}}(0) - p\,\rho_{\mathrm{II}}(0)$ もまた diagonal である。

展開式（2.18）を使って（2.22）式を計算する。（2.18）式の第一項を $\rho'(0)$ に作用させると，

$$e^{-i(1-p)L_0 t}\rho'(0) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-it)^n}{n!}(L_0 - p\,L_0)^n\rho'(0)$$

（2.20）式を証明したのと同じように，（2.24）に注意すると，

$$p\,L_0\,\rho'(0) = p\,[E, \rho_{\mathrm{I}}(0)\,(\rho_{\mathrm{II}}(0) - p\,\rho_{\mathrm{II}}(0)]$$
$$+ p\,[F, \rho_{\mathrm{I}}(0)\,(\rho_{\mathrm{II}}(0) - p\,\rho_{\mathrm{II}}(0))] = 0$$

また

$$p\,L_0\,L_0\,\rho'(0) = 0$$

故に

$$e^{-i(1-p)L_0 t}\rho'(0) = e^{-iL_0 t}\rho'(0) \qquad (2.25)$$

L_0 の定義から明らかなように，この式は次の様に書き換えることができる。

$$e^{-iL_0 t}\rho'(0) = e^{-i(E+F)t}\rho'(0)\,e^{i(E+F)t}$$
$$= e^{-iEt}\rho_{\mathrm{I}}(0)\,e^{iEt}\,e^{-iFt}(\rho_{\mathrm{II}}(0) - p\,\rho_{\mathrm{II}}(0))\,e^{iFt}$$
$$\equiv \widetilde{\rho}_{\mathrm{I}}(t)\cdot\widetilde{B}_d(t) \qquad (2.26)$$

（2.26）の定義から明らかなように，$\widetilde{\rho}_{\mathrm{I}}(t)$ は system I の operator，$B_d(t) = e^{-iFt}(\rho_{\mathrm{II}}(0) - p\,\rho_{\mathrm{II}}(0))\,e^{iFt} = \rho_{\mathrm{II}}(0) - p\,\rho_{\mathrm{II}}(0)$ は system II の operator で diagonal である。

次に展開式（2.18）の第2項を $\rho'(0)$ に作用させる。（2.25）（2.26）（2.9）を使うと，

$$(1-p)L_1 e^{-i(1-p)L_0(t-s)}\rho'(0)=(1-p)L_1\tilde{\rho}_I(t-s)\tilde{B}_d(t-s)$$
$$=(1-p)[G,\tilde{\rho}_I(t-s)\tilde{B}_d(t-s)]$$
$$=[G,\tilde{\rho}_I(t-s)\tilde{B}_d(t-s)]$$

(2.20) 式を証明するのと同様に

$$e^{-i(1-p)sL_0}(1-p)L_1 e^{-i(1-p)L_0(t-s)}\rho'(0)$$
$$=e^{-isL_0}L_1 e^{-iL_0(t-s)}\rho'(0) \qquad (2.27)$$

(2.25) (2.27) をまとめると，(2.22) 式は次の様に書ける。

$$e^{-i(1-p)Lt}\rho'(0)=e^{-iL_0t}\rho'(0)-i\lambda$$
$$\times\int_0^t ds\, e^{-isL_0}L_1 e^{-iL_0(t-s)}\rho'(0)+0(\lambda^2) \qquad (2.28)$$

(2.15) 式の第2項は (2.28) 式を用いると，

$$-i\lambda p[G,e^{-i(1-p)Lt}\rho'(0)]=-i\lambda p[G,e^{-iL_0t}\rho'(0)]$$
$$-\lambda^2 p\left[G,\int_0^t ds\, e^{-isL_0}[G,e^{-iL_0(t-s)}\rho'(0)]\right]+0(\lambda^3)$$

(2.26)，(2.9) 式を用いると，この式の右辺第一項は 0 になることがわかる。故に

$$-i\lambda p[G,e^{-i(1-p)Lt}\rho'(0)]=$$
$$-\lambda^2 p\left[G,\int_0^t ds\, e^{-isL_0}[G,e^{-iL_0(t-s)}\rho'(0)]\right]+0(\lambda^3)$$
$$(2.29)$$

最後に (2.21)，(2.29) 式を (2.15) に代入すると次式を得る。

$$\frac{d}{dt}\sigma(t)=-i[E,\sigma(t)]-\lambda^2 p\left[G,\int_0^t ds\, e^{-isL_0}[G,\sigma(t-s)]\right]$$

$$-\lambda^2 p[G, \int_0^t ds\, e^{-isL_0}[G, e^{-iL_0(t-s)}\rho'(0)]] + 0(\lambda^3) \tag{2.30}$$

§ 3. Wangsness — Bloch equation

この節では実際に（2.30）式の matrix element を計算して Bloch の結果と比べることにする。Eの固有状態をｍで，Ｆの固有状態をｆで指定することにする。その時（2.30）式の右辺第3項のｍｍ element をとり時間積分を実行すると次の式が得られる。

$$-\lambda^2 \langle m|p[G, \int_0^t ds\, e^{-isL_0}[G, e^{-iL_0(t-s)}\rho'(0)]]|m\rangle \cdot T_{r_{II}}(1)$$

$$= -\lambda^2 \sum_{\substack{m'm'' \\ f,f'}} \{\langle mf|G|m'f'\rangle\langle m'f'|G|m''f\rangle\langle m''f|\rho'(0)|mf\rangle \cdot$$
$$\times e^{-i(m''-m)t} \cdot \frac{e^{-it(m'-m''+f'-f)}-1}{-i(m'-m''+f'-f)}$$
$$-\langle mf|G|m'f'\rangle\langle m'f'|\rho'(0)|m''f'\rangle\langle m''f'|G|mf\rangle \cdot$$
$$\times e^{-i(m'-m'')t} \cdot \frac{e^{-it(m''-m+f'-f)}-1}{-i(m''-m+f'-f)}$$
$$-\langle mf|G|m'f'\rangle\langle m'f'|\rho'(0)|m''f'\rangle\langle m''f'|G|mf\rangle \cdot$$
$$\times e^{-i(m'-m'')t} \cdot \frac{e^{-it(m-m'+f-f')}-1}{-i(m-m'+f-f')}$$
$$+\langle mf|\rho'(0)|m'f'\rangle\langle m'f'|G|m''f'\rangle\langle m''f'|G|mf\rangle \cdot$$
$$\times e^{-i(m-m')t} \cdot \frac{e^{-it(m'-m''+f-f')}-1}{-i(m'-m''+f-f')}\} \tag{3.1}$$

ここで（2.24）式において $\rho_I(0)$ もまた diagonal であると仮定すると $\rho'(0)$ はｍについてもｆについても diagonal となる。そこで上式は次の

様になる。

$$= -\lambda^2 \sum_{m'f f'} \Big\{ |\langle mf|G|m'f'\rangle|^2 \cdot \langle mf|\rho'(0)|mf\rangle \frac{e^{-it(m'-m+f'-f)}-1}{-i(m'-m+f'-f)}$$

$$- |\langle mf|G|m'f'\rangle|^2 \langle m'f'|\rho'(0)|m'f'\rangle \frac{e^{-it(m'-m+f'-f)}-1}{-i(m'-m+f'-f)}$$

$$- |\langle mf|G|m'f'\rangle|^2 \langle m'f'|\rho'(0)|m'f'\rangle \frac{e^{-it(m-m'+f-f')}-1}{-i(m-m'+f-f')}$$

$$+ |\langle mf|G|m'f'\rangle|^2 \langle mf|\rho'(0)|mf\rangle \frac{e^{-it(m-m'+f-f')}-1}{-i(m-m'+f-f')} \Big\} \tag{3.2}$$

$m'-m+f'-f=\alpha$ とおき，α が連続に変化する場合には前式の第1項は次の様に書くことができる。

$$\int f(\alpha) \frac{e^{-it\alpha}-1}{-i\alpha}\, d\alpha \tag{3.3}$$

ところでよく知られているように t が十分大きく $f(\alpha)$ がゆっくり変化する関数の場合には，次式が成り立つ。即ち

$$\int f(\alpha) \frac{e^{-it\alpha}-1}{-i\alpha}\, d\alpha = \int d\alpha\ f(\alpha)\, \delta_+(\alpha)\, \pi \tag{3.4}$$

ここで $\delta_+(\alpha)$ は次式で与えられる。

$$\pi\, \delta_+(\alpha) = \pi\, \delta(\alpha) + i\,\mathscr{P}\left(\frac{1}{\alpha}\right) \tag{3.5}$$

$\mathscr{P}$ は $1/\alpha$ の principal part を表わす。
実際，Bloch の考えている Hamiltonian では molecular surroundings の Hamiltonian F は連続な固有値をもつと仮定しているので，上に述べたことは正しい。よって t が十分大きい場合には，(3.2) 式は次の様になる。

$$- \lambda^2 \sum_{m',f,f'} |\langle mf|G|m'f'\rangle|^2 \{\langle mf|\rho'(0)|mf\rangle - \langle m'f'|\rho'(0)|m'f'\rangle\} \times$$
$$\times\ 2\pi\ \delta(m'-m+f'-f) \qquad (3.6)$$

(3.6) 式からわかるように t = 0 で $\rho(0) = \rho_{\mathrm{I}}(0)\ \rho_{\mathrm{II}}(0)$ が diagonal であるなら十分大きい t に関して (2.30) 式の右辺第3項は時間に依存しない。

次に同じようにして (2.30) 式の右辺第2項の m－m element を計算すると次式を得る。

$$- \lambda^2 \langle m|p[G, \int_0^t ds\, e^{-iL_0 s}[G, \sigma(t-s)]]|m\rangle \cdot T_{r_{\mathrm{II}}}[1]$$

$$= -\lambda^2 \int_0^t ds \sum_{\substack{m'm''\\ ff'}} \{\langle mf|G|m'f'\rangle\langle m'f'|G|m''f\rangle e^{-is(f'-f+m'-m)}$$
$$\times \langle m''|\sigma(t-s)|m\rangle$$

$$- \langle mf|G|m'f'\rangle\langle m''f'|G|mf\rangle e^{-is(f'-f+m'-m)} \cdot \langle m'|\sigma(t-s)|m''\rangle$$

$$- \langle mf|G|m'f'\rangle\langle m''f'|G|mf\rangle e^{-is(f-f'+m-m'')} \cdot \langle m'|\sigma(t-s)|m''\rangle$$

$$+ \langle m'f|G|m''f'\rangle\langle m''f'|G|mf\rangle e^{-is(f-f'+m-m'')} \langle m|\sigma(t-s)|m'\rangle\}$$
$$(3.7)$$

σ が平衡分布から少しずれている時には，次の様に σ を仮定することができる。

$$\sigma(t-s) = \frac{e^{-\beta(t-s)E}}{T_r[e^{-\beta(t-s)E}]} \cdot \frac{1}{T_{r_{\mathrm{II}}}[1]} \qquad (3.8)$$

この時 (3.7) 式は次の様に書ける。

$$- \lambda^2 \int_0^t ds \sum_{m'ff'} |\langle mf|G|m'f'\rangle|^2 [e^{-is(f'-f+m'-m)} + e^{-is(f-f'+m-m')}] \times$$
$$\times \{\langle m|\sigma(t-s)|m\rangle - \langle m'|\sigma(t-s)|m'\rangle\} \qquad (3.9)$$

ところで (2.30) 式の diagonal element は次式で与えられる。

$$\frac{d}{dt}\langle m|\sigma(t)|m\rangle = -\lambda^2\langle m|p[G,\int_0^t ds\, e^{-isL_0}[G,\sigma(t-s)]]|m\rangle$$

$$-\lambda^2\langle m|p[G,\int_0^t ds\, e^{-isL_0}[G,\rho'(0)]]|m\rangle + 0(\lambda^3) \tag{3.10}$$

ここで十分大きな t について，$\sigma(t-s)$ は e^{-isL_0} に比べてゆっくり変化すると仮定すると，

$$\frac{d}{dt}\langle m|\sigma(t)|m\rangle \simeq -\lambda^2\langle m|p[G,\int_0^t ds\, e^{-isL_0}[G,\sigma(t)]]|m\rangle$$

$$-\lambda^2\langle m|p[G,\int_0^t ds\, e^{-isL_0}[G,\rho'(0)]]|m\rangle + 0(\lambda^3) \tag{3.11}$$

$$\simeq -\lambda^2\langle m|p[G,\int_0^\infty ds\, e^{-isL_0}[G,\sigma(t)]]|m\rangle$$

$$-\lambda^2\langle m|p[G,\int_0^\infty ds\, e^{-isL_0}[G,\rho'(0)]]|m\rangle \tag{3.12}$$

次の様なよく知られた公式を使うと

$$\int_0^\infty e^{i\alpha t}dt = \pi\ \delta_+(\alpha) \tag{3.13}$$

ここで $\pi\ \delta_+(\alpha)$ は (3.5) で与えられる。
(3.9) 式はこの仮定の下で次の様になる。

$$-2\pi\lambda^2\sum_{m'ff'}|\langle mf|G|m'f'\rangle|^2\,\delta(f'-f+m'-m)$$

$$[\langle m|\sigma(t)|m\rangle - \langle m'|\sigma(t)|m'\rangle] \tag{3.14}$$

(3.6) と (3.14) 式を用いると (3.10) は次の様に書ける。

$$\frac{d}{dt}\langle m|\sigma(t)|m\rangle = -\frac{2\pi\lambda^2}{T_{r_{II}}[1]}\sum_{m'ff'}|\langle mf|G|m'f'\rangle|^2\delta(f'-f+m'-m)$$
$$\times[\langle m|\sigma(t)|m\rangle - \langle m'|\sigma(t)|m\rangle]$$
$$-\frac{2\pi\lambda^2}{T_{r_{II}}[1]}\sum_{m'ff'}|\langle mf|G|m'f'\rangle|^2\delta(f'-f+m'-m)$$
$$\times[\langle mf|\rho'(0)|mf\rangle - \langle m'f'|\rho'(0)|m'f'\rangle] \tag{3.15}$$

具体的に Hamiltonian E, Perturbation G を書くと，次の様になる。[1)]

$$E = -\omega I_z$$

$$G = \sum_{\ell,t} I_\ell^t F_\ell^{-t}$$

$\ell = 1$ の場合だけを考えると

$$I_1^0 = I_z,\quad I_1^{\pm1} = I^{\pm},\quad I_1^t = 0 \quad \text{for } |\tau| > 1$$

そこで I_z の平均値を求めて見ると次の式を得る。（$T_{r_{II}}[1]$ をかけることは σ の normalization のためである。）

$$\frac{d}{dt}\langle I_z(t)\rangle = T_{r_{II}}[1]\sum_m \langle m|I_z|m\rangle\frac{d}{dt}\langle m|\sigma(t)|m\rangle$$
$$= -\frac{1}{T_1}\left[\langle I_z(t)\rangle - \left(1-\frac{T_1}{T_{1'}}\right)\langle I_z\rangle_0\right] \tag{3.16}$$

ここで $\rho(0)$ についての条件（2.24）は次の様にした。

$$\rho(0) = \frac{e^{-\beta_E E - \beta_F F}}{T_r[e^{-\beta_E E - \beta_F F}]},\quad \sigma(0) = \frac{e^{-\beta_E E}}{T_r[e^{-\beta_E E}]}\cdot\frac{1}{T_{r_{II}}[1]} \tag{3.17}$$

その時（3.16）式において

$$\frac{1}{T_1} = \frac{4\pi\lambda^2}{T_{r_{II}}[1]} \sum_f \langle f|F_1^1|f+\omega\rangle \langle f+\omega|F_1^{-1}|f\rangle \tag{3.18}$$

$$\frac{1}{T_1'} = \frac{4\pi\lambda^2}{T_{r_{II}}[e^{-\beta_F F}]} \sum_f \langle f|F_1^1|f+\omega\rangle \langle f+\omega|F_1^{-1}|f\rangle e^{-\beta_F f} \tag{3.19}$$

$$\langle I_z\rangle_0 = T_{r_{II}}[1]\cdot T_{r_I}[I_z\cdot\sigma(0)] = \frac{T_{r_I}[I_z e^{-\beta_F E}]}{T_{r_I}[e^{-\beta_E E}]} \tag{3.20}$$

以上の結果は Bloch の結果とかなり異っている。これは § 1 で述べられた仮定の違いによるものと思われる。

しかし (3.16), (3.18) (3.19) から明らかなように (3.16) の定常的な解

$$\langle I_z\rangle = \left(1-\frac{T_1}{T_1'}\right)\langle I_z\rangle_0 \tag{3.21}$$

は $\beta_E = 0$ の時 zero となり，これは Bloch の場合の $\kappa = 0$ の時に $\langle I_z\rangle$ が zero になるのと一致している。

§ 4. Application

この節では次の Hamiltonian[2] で表わせる系に以上の結果を適用する。

$$H = H_z + H_L + V \tag{4.1}$$

ここで H_z は z 方向にかけられた一定の磁場 H_z の下での Zeeman energy，即ち $\hbar = 1$ とする単位系で

$$H_z = -\omega_z \sum_j I_{iz} \qquad \omega_z = \gamma H_z \tag{4.2}$$

ここで γ は gyromagnetic ratio である。H_L は nuclear motion のエネルギー，V は dipolar interaction のエネルギーを表わす。即ち，

$$V=\sum_{\alpha=-2}^{2} V^{(\alpha)}=\sum_{\alpha=-2}^{2}\sum_{j>k}\Phi_{jk}^{-\alpha}\{jk\}_{\alpha} \tag{4.3}$$

ここで簡略記号は次の様に定義される。

$$\Phi_{jk}^{\pm 2}=-\frac{3}{4}\gamma^{2}\,r_{jk}^{-5}(x_{jk}\pm i\,y_{jk})^{2}$$

$$\Phi_{jk}^{\pm 1}=-\frac{3}{2}\gamma^{2}\,r_{jk}^{-5}\,z_{jk}(x_{jk}\pm i\,y_{jk})$$

$$\Phi_{jk}^{0}=-\gamma^{2}\,r_{jk}^{-5}(3z_{jk}^{2}-r_{jk}^{2}) \tag{4.4}$$

r_{jk} 等は核の相対座標を示す。

$$\{jk\}_{2}=I_{j}^{+}I_{k}^{+} \qquad \{jk\}_{1}=I_{j}^{+}I_{kz}+I_{jz}I_{k}^{+}$$

$$\{jk\}_{0}=I_{jz}I_{kz}-\frac{1}{4}(I_{j}^{+}I_{k}^{-}+I_{j}^{-}I_{k}^{+})$$

$$\{jk\}_{-2}=I_{j}^{-}I_{k}^{-} \qquad \{jk\}_{-1}=I_{j}^{-}I_{kz}+I_{jz}I_{k}^{-} \tag{4.5}$$

$I_z=\sum_j I_{jz}$ の平均値は（2.30）式を用いると次の様に書ける。

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle I_z(t)\rangle &= \frac{d}{dt}T_{r_{\rm I}}[\sigma(t)\,I_z]\cdot T_{r_{\rm II}}[1]\\ &=-i\,T_{r_{\rm I}}\{I_z[H_z,\sigma(t)]\}\cdot T_{r_{\rm II}}[1]\\ &\quad-\int_0^t ds\,T_r\{\sigma(t-s)[[I_z,V(s)],V]\}\\ &\quad-\int_0^t ds\,T_r\{\rho'(0)[[I_z,V(s)],V]\}\end{aligned} \tag{4.6}$$

ここで $T_{r_{\rm II}}[1]$ は σ の normalization のためである。（4.6）式において

$$V(s)=e^{i(H_Z+H_L)s}\cdot V\cdot e^{-i(H_Z+H_L)s}$$

$$= \sum_{\alpha} e^{-i\alpha\omega_z s} \sum_{j>k} \Phi_{jk}^{-2}(s)\ \{jk\}_\alpha$$

$$\Phi_{jk}^{-\alpha}(s) = e^{iH_L s}\, \Phi_{jk}^{-\alpha}\, e^{-iH_L s} \qquad (4.7)$$

関係式

$$[\, I_z,\ V^{(\alpha)} \,] = \alpha\, V^{(\alpha)} \qquad (4.8)$$

と（4.7）式を用いると（4.6）式の第２項は次の様に書き換えられる。

$$-\sum_{\alpha\neq 0} \alpha \cdot \int_0^t e^{-i\alpha\omega_z s} ds \sum_{j>k} T_r \{ \sigma(t-s) [\Phi_{jk}^{-\alpha}(s)\{jk\}_\alpha \cdot V] \} \qquad (4.9)$$

§３で述べられた仮定（3.8）（3.1２）を使うと（4.9）式は次の様になる。

$$\simeq -\sum_{\alpha\neq 0} \sum_{j>k} \alpha \int_0^\infty ds\, e^{-i\alpha\omega_z s}\, T_{r_{\mathrm{II}}} [\Phi_{jk}^{-\alpha}(s)\Phi_{jk}^{\alpha}] \cdot T_{r_{\mathrm{I}}} \{ \sigma(t) [\{jk\}_\alpha, \{jk\}_{-\alpha}] \}$$

$$= -\sum_{\alpha=1,2,} \sum_{j>k} \alpha \int_{-\infty}^\infty ds\, e^{-i\alpha\omega_z s}\, T_{r_{\mathrm{II}}} [\Phi_{jk}^{-\alpha}(s)\Phi_{jk}^{\alpha}] \cdot T_{r_{\mathrm{I}}} \{ \sigma(t) [\{jk\}_\alpha, \{jk\}_{-\alpha}] \} \qquad (4.10)$$

（4.5）式を使うと

$$= -\frac{1}{2}\sum_{j\neq k} 4 \int_{-\infty}^\infty ds\, e^{-i2\omega_z s}\, T_{r_{\mathrm{II}}} [\Phi_{jk}^{-2}(s)\Phi_{jk}^{2}] \cdot T_{r_{\mathrm{I}}} \{ \sigma(t) \cdot 2I_{jz}(I_{kx}^2 + I_{ky}^2) \}$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{j\neq k} 2 \int_{-\infty}^\infty ds\, e^{-i\omega_z s}\, T_{r_{\mathrm{II}}} [\Phi_{jk}^{-1}(s)\Phi_{jk}^{1}] \cdot T_{r_{\mathrm{I}}} \{ \sigma(t) \cdot 2I_{jz} I_{kz}^2 \} \qquad (4.11)$$

$I = \frac{1}{2}$ の時には $I_x^2 + I_y^2 = I(I+1) - I_z^2$ に注意すると，

$$= -\sum_{j \neq k} 2 \int_{-\infty}^{\infty} ds\, e^{-i2\omega_z s}\, T_{r_{\mathrm{II}}}[\Phi_{jk}^{-2}(s)\,\Phi_{jk}^{2}] \cdot T_{r_{\mathrm{I}}}[\sigma(t)\, I_{jz}]$$

$$- \sum_{j \neq k} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} ds\, e^{-i\omega_z s}\, T_{r_{\mathrm{II}}}[\Phi_{jk}^{-1}(s)\,\Phi_{jk}^{1}] \cdot T_{r_{\mathrm{I}}}[\sigma(t)\, I_{jz}]$$

$$= -\frac{1}{T_1} < I_z(t) > \qquad (4.12)$$

ここで

$$\frac{1}{T_1} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} ds\, e^{-i2\omega_z s} \frac{\Sigma_k T_{r_{\mathrm{II}}}[\Phi_{jk}^{-2}(s)\Phi_{jk}^{2}]}{T_{r_{\mathrm{II}}}[1]}$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} ds\, e^{-i\omega_z s} \frac{\sum_k T_{r_{\mathrm{II}}}[\Phi_{jk}^{-1}(s)\,\Phi_{jk}]}{T_{r_{\mathrm{II}}}[1]} \qquad (4.13)$$

故に t＝0 で次の様な仮定をすると，

$$\rho(0) = \frac{e^{-\beta_z H_z - \beta_L H_L}}{T_r[e^{-\beta_z H_2 - \beta_L H_L}]}, \quad \sigma(0) = \frac{e^{-\beta_z H_z}}{T_{r_{\mathrm{I}}}[e^{-\beta_z H_z}]} \cdot \frac{1}{T_{r_{\mathrm{II}}}[1]} \qquad (4.14)$$

(4.6) 式は結局次の様になる。

$$\frac{d}{dt} < I_z(t) > = -\frac{1}{T_1}[< I_z(t) > - (1 - \frac{T_1}{T_1'}) < I_z >_0] \qquad (4.15)$$

ここで

$$< I_z >_0 = T_{r_{\mathrm{I}}}[I_z\, \sigma(0)] \cdot T_{r_{\mathrm{II}}}[1] = \frac{T_{r_{\mathrm{I}}}[I_z \cdot e^{-\beta_z H_z}]}{T_{r_{\mathrm{I}}}[e^{-\beta_z H_z}]} \qquad (4.16)$$

$$\frac{1}{T_1'} = 2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} ds\, e^{-i2\omega_z s} \frac{\sum_k T_{r_{\mathrm{II}}}[\Phi_{jk}^{-2}(s)\,\Phi_{jk}^{2}\, e^{-\beta_L H_L}]}{T_{r_{\mathrm{II}}}[e^{-\beta_L H_L}]}$$

$$+ \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} ds\, e^{-i\omega_z s} \frac{\sum_k T_{r_{\mathrm{II}}}[\Phi_{jk}^{-1}(s)\,\Phi_{jk}^{1} 3 e^{-\beta_L H_L}]}{T_{r_{\mathrm{II}}}[e^{-\beta_L H_L}]} \qquad (4.17)$$

spin−lattice 緩和時間 T_1 は（4.13）式の microcanonical は平均を canonical な平均で置きかえれば Kubo−Tomita の結果[2]と一致する。すなわち，Kubo−Tomita の結果は T_1 よりむしろ T_1' である。また§3と同じように（4.15）式の定常的な解は

$$\langle I_z \rangle = \left(1-\frac{T_1}{T_1'}\right) \langle I_z \rangle_0 \qquad (4.18)$$

で与えられ，（4.13），（4.17）より $\beta_L = 0$ のとき，即ち $t=0$ での lattice 系の温度が∞ならば

$$\langle I_z \rangle = 0 \quad \text{for} \quad \beta_L = 0 \qquad (4.19)$$

である。

謝　　辞

種々の御指導をいただいた加藤先生に感謝いたします。

References

1） R.K.Wangsness and F.Bloch
Phys. Rev. 89 (1953) 728
F.Bloch Phys, Rev. 102 (1956) 104
F.Bloch Phys. Rev. 105 (1957) 1206

2） R.Kubo and K.Tomita
J.Phys, Soc, Japan 9 (1954) 888